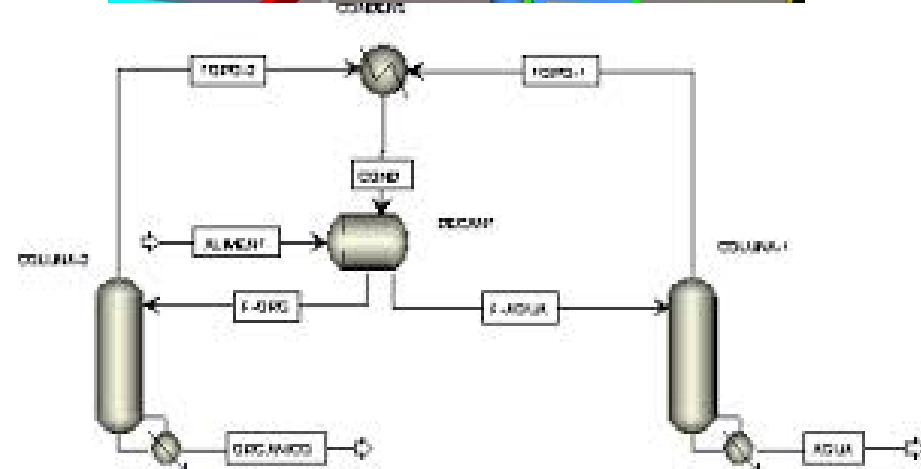
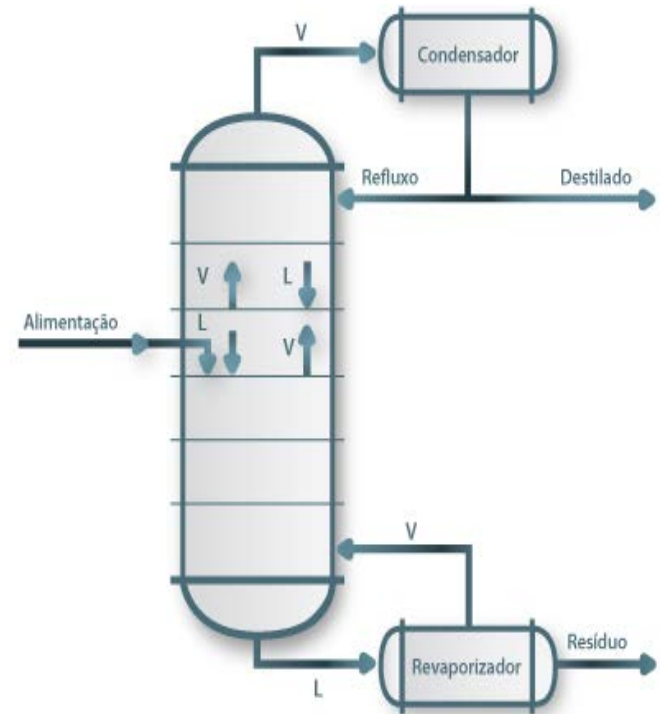
SIMULAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Introdução

Curso de Graduação em Engenharia Química
Professora – Mariana Lima Acioli Murari

O que é simular?

- **Simulação** consiste em empregar formalizações em computadores, tais como expressões matemáticas ou especificações mais ou menos formalizadas, com o propósito de imitar um processo ou operação do mundo real

Objetivos

- Projetar novas unidade (Projeto processos)
- Melhorar a operação (Otimizar processos)
- Treinar pessoas (operadores, engenheiros de produção)
- Controle dos pontos de operação frente a perturbações (Controle de Processos)

Conceitos básicos

- **Processo:**

arranjo de unidades de operação (reatores, trocadores de calor, colunas de destilação, etc.) integradas entre si em uma maneira racional e sistemática.

Conceituos básicos

- **Modelo**

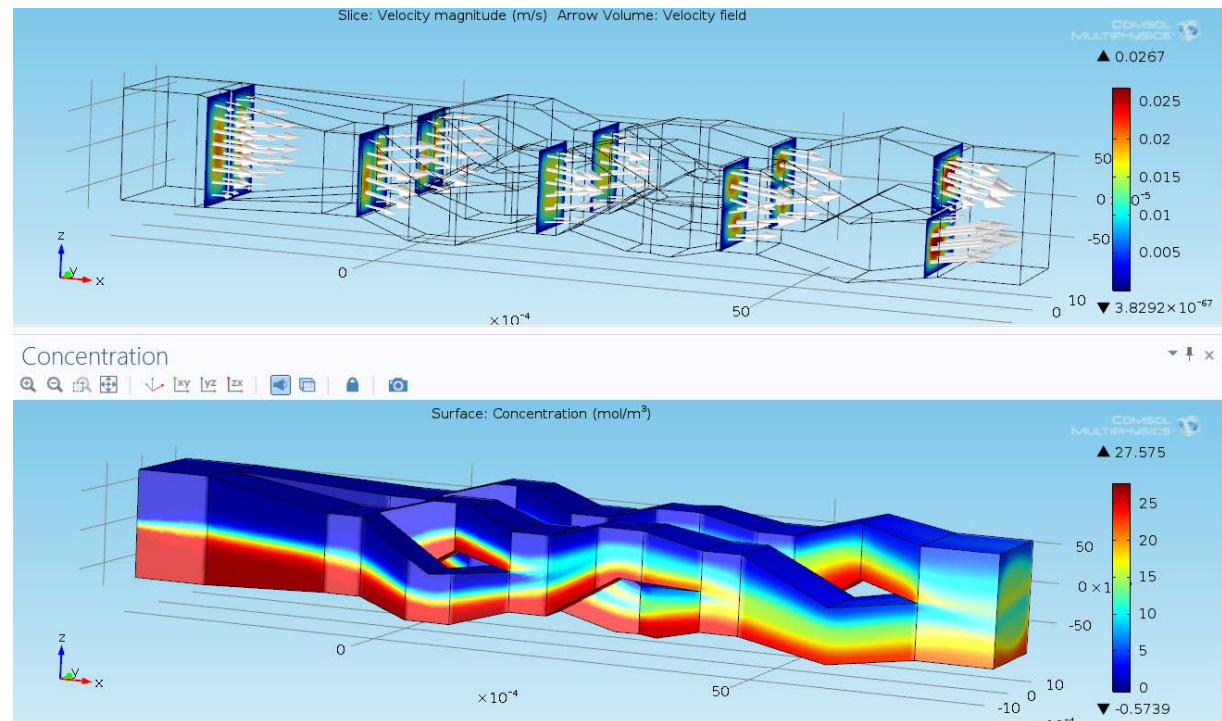
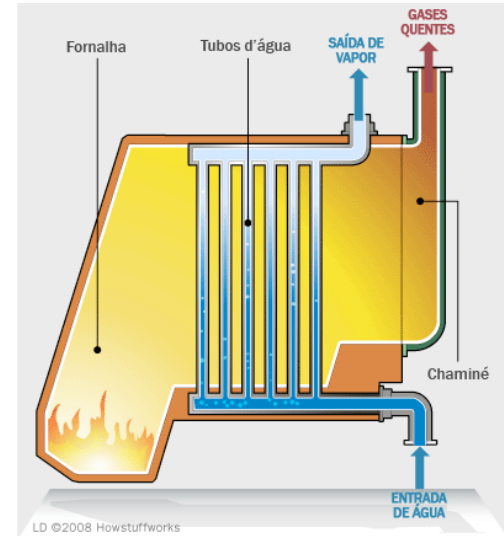
descrição matemática de processos.

- **Bases para os modelos matemáticos:**

leis fundamentais da física e química, tais como as leis de conservação de massa, energia e quantidade de movimento, e os conceitos de equilíbrio.

Conceitos básicos

Áreas de conhecimento básico:

- escoamento de fluidos
- transferência de calor
- transferência de massa
- cinética
- termodinâmica
- controle

Conceitos básicos

Definições:

- **variável:**

símbolo matemático.

- **variável de estado:**

descreve o comportamento do sistema.

- **variável a determinar:**

variável cujo valor é desconhecido.

- **equação:**

expressão matemática relacionando as variáveis.

Conceitos básicos

- **parâmetro:**

uma propriedade do processo ou de seu ambiente, que pode assumir um valor conhecido ou ser estimado (uma constante ou coeficiente em uma equação).

- **especificação:**

variável cujo valor é atribuído a cada simulação.

Conceituos básicos

Conceitos básicos

- **graus de liberdade:**

n^0 de variáveis − nº de parâmetros − nº de especificações − nº de forças motrizes − nº de equações =

nº de variáveis a determinar − nº de equações.

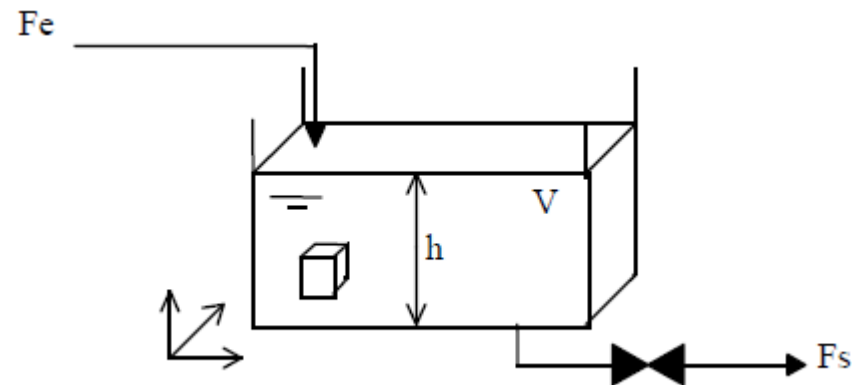
IGUAL

ZERO

Elementos básicos na modelagem

- descrição do processo e definição do problema
- teoria e aplicação das leis fundamentais
- equacionamento
- considerações
- consistência
- solução desejada
- matemática e computação
- solução e validação

Exemplo 1

Descrição do processo: um líquido entra e sai de um tanque pela ação da gravidade. Deseja-se analisar a variação de volume, altura e vazão do tanque (resposta do sistema) frente a variações na alimentação (perturbação no sistema).

Vamos exercitar!!!!!

Exemplo

- **Quais as bases para os modelos matemáticos?**

Teoria: - conservação de massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -(\nabla . \rho v)$$

- conservação da quantidade de movimento

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = \underbrace{-[\nabla . \rho v v]}_{\text{advecção}} \quad \underbrace{-\nabla P}_{\text{força de pressão}} \quad \underbrace{-[\nabla . \tau]}_{\text{transf. viscosa}} \quad \underbrace{+\rho g}_{\text{força gravitacional}}$$

- conservação de energia

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(\hat{U}+\frac{1}{2}v^2\right)\right] = \underbrace{-\left(\nabla . \rho v\left(\hat{U}+\frac{1}{2}v^2\right)\right)}_{\text{advecção}} \quad \underbrace{-(\nabla . q)}_{\text{condução}}$$

$$\underbrace{-\rho\left(v . \nabla \hat{\phi}\right)}_{\text{trab. forças gravit.}} \quad \underbrace{-(\nabla . P v)}_{\text{trab. forças de pressão}} \quad \underbrace{-(\nabla . [\tau . v])}_{\text{trab. forças viscosas}}$$

onde $\nabla \hat{\phi} = -g$.

Exemplo

Considerações:

- isotérmico
- massa específica constante
- mistura perfeita

$$F_s = K\sqrt{h}$$

Equacionamento:

balanço material: $F_e - F_s = \rho \frac{dV}{dt}$

dimensão: $V = A\,h$

hidrodinâmica: $F_s = K\sqrt{h}$

Exemplo

Consistência:

checar se o número de equações é igual ao número de variáveis a determinar (grau de liberdade zero).

- variáveis: *Fe, Fs,* ρ*, V, A, h, K, t* ⇒ 8
- equações: 3
- constantes: ρ*, K, A* ⇒ 3
- especificações: *t* ⇒ 1
- forças motrizes: *Fe* ⇒ 1
- variáveis a determinar: *V, h, Fs* ⇒ 3

Graus de liberdade:

3 variáveis desconhecidas – 3 equações = 0

Exemplo

Checar a consistência das unidades de medida de todos os termos envolvidos nas equações.

- *Fe, Fs* (kg/s)
- ρ (kg/ m3)
- *V* (m3)
- *A* (m2)
- *h* (m)
- *K* (kg/m0,5 s1)

Exemplo

Solução desejada:

- Dada uma condição inicial (h ou V), deseja-se analisar $h(V)$, $V(Fe)$, $Fs(h)$.

Como $h = f(V)$ e $V = f(Fe) \Rightarrow h(Fe)$

- $Fs = f(h)$ e $h = f(Fe) \Rightarrow Fs(Fe)$

logo pode-se analisar todas as variações em função de uma dada perturbação em Fe.

Exemplo

Matemática e computação:

$$F_e - F_s = \rho \frac{dV}{dt} \qquad V = Ah \quad \text{e} \quad F_s = K\sqrt{h}$$

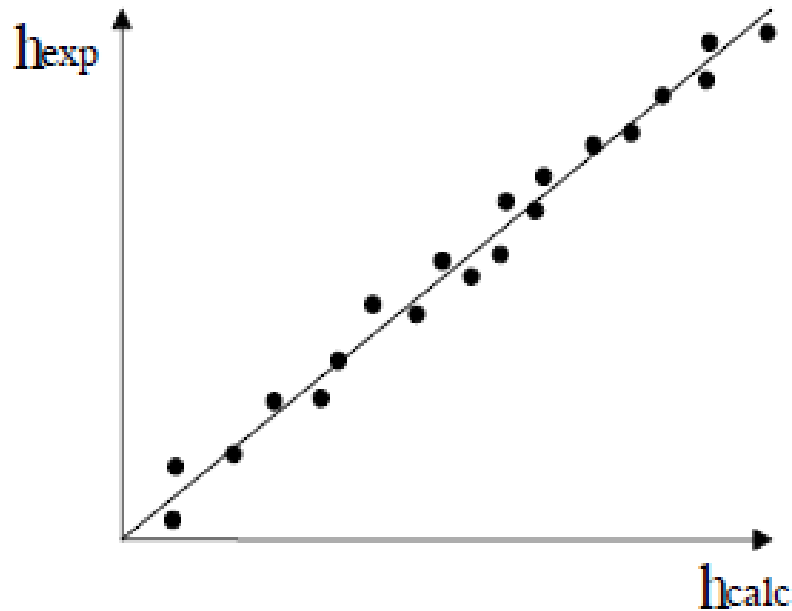
$$\begin{cases} \dfrac{dh}{dt} = \dfrac{F_e \quad k\sqrt{h}}{\rho A} \\ \\ h(t_0) = h_0 \end{cases}$$

$$V = Ah \qquad \Rightarrow \qquad V(t, F_e)$$

$$F_s = K\sqrt{h} \qquad \Rightarrow \qquad F_s(t, F_e)$$

Exemplo

Solução e validação:

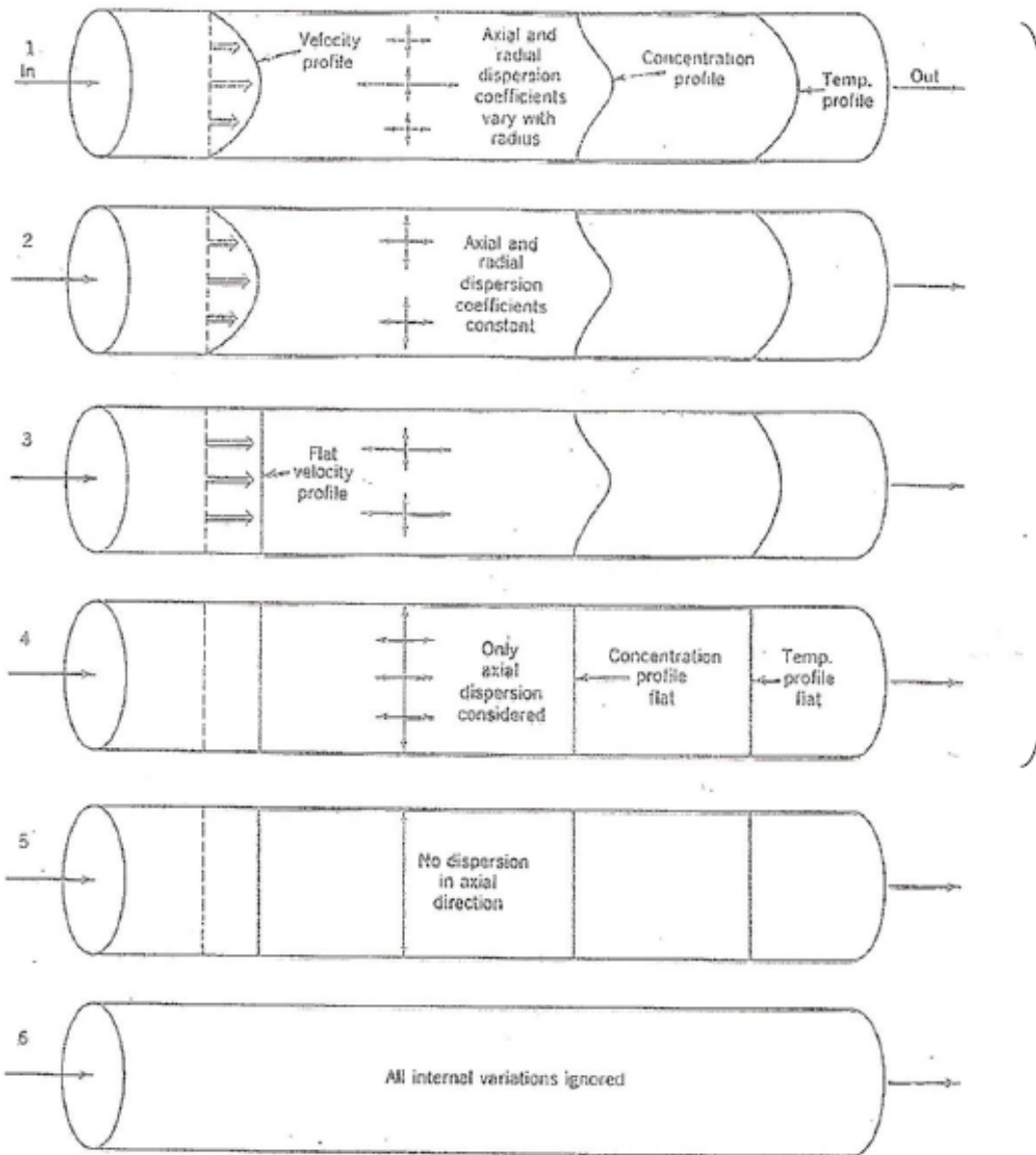
comparar os resultados com dados experimentais

Classificação dos modelos

- Deterministico:

- Probabilistico:

Classificação de modelos matemáticos de processos

Baseada no detalhamento dos princípios físico-químicos:

- modelo molecular e atômico (entidades individuais)
- modelo microscópico (interações moleculares ignorados, balanço diferencial é feito para massa, quantidade de movimento e energia)
- modelo de gradientes múltiplos (similar porém utiliza coeficientes modificados)
- modelo de gradientes máximos (somente o maior componente do gradiente da variável dependente é mantido nos balanços)
- modelo macroscópico (As variáveis dependentes representam valores médios sobre o volume do sistema)

Modelo Microscópico

Modelo de Gradientes Múltiplos

Modelo de Máximo Gradiente

Modelo de Macroscópico

Classificação de modelos matemáticos de processos

Baseada no espaço de definição das variáveis

- modelo em variáveis discretas
- modelo em variáveis contínuas

Baseada na variável temporal:

- modelo em estado estacionário
- modelo dinâmico

Baseada nas variáveis espaciais:

- modelo de parâmetros concentrados
- modelo de parâmetros distribuídos

Classificação de modelos matemáticos de processos

Linearidade

- Linear
- Não linear

	Equações lineares			Equações não-lineares		
	uma equação	algumas equações	muitas equações	uma equação	algumas equações	muitas equações
Algébrica	trivial	fácil	praticamente impossível	muito difícil	muito difícil	impossível
Diferencial ordinária	fácil	difícil	praticamente impossível	muito difícil	impossível	impossível
Diferencial parcial	difícil	praticamente impossível	impossível	impossível	impossível	impossível

MODELO MATEMÁTICO
DETERMINÍSTICO
PROBABILÍSTICO
EQUAÇÕES ALGÉBRICAS
(ESTADO ESTACIONÁRIO, SISTEMA DE PARÂMETROS CONCENTRADOS)
EQUAÇÕES INTEGRAIS
(VARIÁVEIS CONTÍNUAS)
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
(VARIÁVEIS CONTÍNUAS)
EQUAÇÕES DE DIFERENÇAS
(VARIÁVEIS DISCRETAS)
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS
ESTADO ESTACIONÁRIO
(PARÂMETRO DISTRIBUÍDO)
ESTADO TRANSIENTE
(PARÂMETROS CONCENTRADOS)
ESTADO TRANSIENTE
(PARÂMETROS DISTRIBUÍDOS)
ESTADO ESTACIONÁRIO
(PARÂMETROS DISTRIBUÍDOS)
ESTADO TRANSIENTE
ESTADO ESTACIONÁRIO
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DE DIFERENÇAS
EQUAÇÕES DE DIFERENÇAS

SISTEMA DE EQUAÇÕES ALGÉBRICO-DIFERENCIAIS
EQUAÇÕES ALGÉBRICAS
EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
LINEARES
NÃO LINEARES
PARCIAIS
ORDINÁRIAS
MÉTODOS DIRETOS
MÉTODOS ITERATIVOS
DISCRETIZAÇÃO
FATORIZAÇÕES
PROBLEMA DE VALOR INICIAL
PROBLEMA DE VALOR DE CONTORNO
CHOLESKY
LDU
LU
QR
WZ
JACOBI
GAUSS-SEIDEL
SOR
ADI
MONTE CARLO
MINIMIZAÇÃO
NEWTON-RAPHSON
CONTINUAÇÃO
SUBSTITUIÇÃO
EULER
RUNGE-KUTTA
EXTRAPOLAÇÕES
STEFFENSON
NEWTON-RAPHSON
RELAXAÇÃO
FORMAS DE ONDA
CONTINUAÇÃO
PREDIÇÃO-CORREÇÃO
SHOOTING
MULTISHOOTING
SUPERPOSIÇÕES
DIFERENÇAS F.
ELEMENTOS F.
VOLUMES F.

Classificação de Métodos Numéricos para Simulação de Modelos

Baseada na forma de expressar as variáveis:

- explícitos
- semi-implícitos
- implícitos

Baseada na forma de resolução

- direto
- iterativo

Baseada no fluxo de informações

- modular sequencial
- modular simultâneo
- simultâneo

Vamos exercitar?

- Identifique para o exemplo do tanque?

1. Qual o tipo de modelo e equações
2. Quais métodos numericos podem ser utilizados
3. A classificação do modelo
4. Resolução fácil ou difícil